

Zeitschrift für Kristallographie

International Journal for Structural, Physical,
and Chemical Aspects of Crystalline Materials

Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart
with the assistance of W. Hönle, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · L. D. Calvert, Ottawa
P. Hartman, Utrecht · E. Hellner, Marburg/Lahn
F. Liebau, Kiel · A. Niggli, Zürich
M. Renninger, Marburg/Lahn · S. Rundqvist, Uppsala
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo · B. J. Wuensch, Cambridge, MA

Volume 171 1985



R. Oldenbourg Verlag · München

© R. Oldenbourg Verlag, München 1985. – Printed in Germany. – Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photo-mechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen – auch auszugsweise – bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

Vol. 171 No. 1/2 1985

H. Sabrowsky, P. Mertens, A. Thimm

KLiO: Ein Oxid mit dreifach koordiniertem Lithium 1

A. Whitaker, N. Walker

The crystal structure of aceto-acetanilide azo-pigments VI. C.I. Pigment Yellow 4, α -(1-hydroxyethylidene) acetanilide- α -azo-(4'-nitrobenzene) 7

A. Whitaker

The crystal structure of aceto-acetanilide azo-pigments VII. A polymorph (α) of C.I. Pigment Yellow 5, α -(1-hydroxyethylidene) acetanilide- α -azo-(2'-nitrobenzene) 17

W. B. Pearson

The Cu_2Sb and related structures 23

H. Böhm, H. G. von Schnering

The modulated structure of niobium tetratelluride NbTe_4 41

J. M. Bennett, J. V. Smith

Enumeration of 4-connected 3-dimensional nets and classification of framework silicates. 3D nets based on the 4.6.12 and $(4.6.10)_4$ (6.6.10): 2D nets 65

S. Lokanatha, B. K. Mathur, B. K. Samantaray,

S. Bhattacharjee

Dehydration and phase transformation in sepiolite. A radial distribution analysis study 69

G. Heiss, J. Zemann

Elektrostatische Berechnungen an Karbonaten mit aplanaren Karbonatgruppen 81

E. F. Paulus, W. Rieper

Ein Phenyl-„azo“-Derivat des Acetessigsäureanilids mit zwei unterschiedlichen Konformeren im Kristallverband 87

S. Sharma, H. Paulus, N. Weiden, A. Weiss

Structure and C-Cl bond in 1-Cl-3-NO₂C₆H₄. A ³⁵Cl-NQR and X-ray single crystal study **101**

M. T. Averbuch-Pouchot

Crystal data on Zn₃Rb₂(P₂O₇)₂ and Co₃Rb₂(P₂O₇)₂. Crystal structure of Zn₃Rb₂(P₂O₇)₂ **113**

A. Kirfel, F. Wallrafen

The crystal structure of L(+)-glutamic acid hydroiodide, L-C₅H₉NO₄ · HI **121**

K.-F. Tebbe, U. Georgy

Bleihalogenide ungewöhnlicher Zusammensetzung und Struktur: Iodid von Wells K₂PbI_{4/2}I₂ · 2H₂O · xKI₃ · yH₂O (x=0,237, y=0,37) **129**

Å. Kvik, K. Ståhl, J. V. Smith

A neutron diffraction study of the bonding of zeolitic water in scolecite at 20 K **141**

Short Communication

B. Chabot, H. Sarp

Structure refinement of Gysinite La_{0.16}Nd_{1.18}Pb_{0.66}(CO₃)₂(OH)_{1.34} · 0.66H₂O **155**

Vol. 171 No. 3/4 1985

A. K. Pal, R. R. Bandyopadhyay, B. S. Basak

Crystal and molecular structure of p-methoxy phenyl, p'-methoxy phenyl, 1:1 dichloromethane 159

A. E. Koziol, K. Kurys, M. Janczewski

The crystal structure of p-nitrobenzyl ester of (+)-1,5-nitronaphthyl-sulfinylacetic acid 165

C. Mahadevan, M. Seshasayee, S. Sastry, Ch. Subrahmanyam

Crystal and molecular structure of tris(ethylenediamine) cadmium(II) iodide, $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2)_3\text{CdI}_2$ 173

E. Makovicky, R. Nørrestam

The crystal structure of jaskolskiite, $\text{Cu}_x\text{Pb}_{2+x}(\text{Sb}, \text{Bi})_{2-x}\text{S}_5$ ($x \approx 0.2$), a member of the meneghinite homologous series 179

R. R. Bandyopadhyay, S. C. Kundadas, B. S. Basak

Crystal and molecular structure of 2-hydroxy, 4-amine, w-w', dichloroacetophenone 195

K. Ravikumar, S. S. Rajan, S. Natarajan, M. N. Ponnuswamy, J. Trotter

Structure of diaquabisglycinecobalt(II) bromide 201

F. H. Herbststein, M. Kapon, G. M. Reisner

Crystal structures of chromium(III) fluoride trihydrate and chromium(III) fluoride pentahydrate. Structural chemistry of hydrated transition metal fluorides. Thermal decomposition of chromium(III) fluoride nonahydrate 209

A. Radha

Crystal and molecular structure of 2-mercaptobenzothiozole - A redetermination 225

J. M. Mohedano, F. Florencio, S. Garcia-Blanco

Crystal and molecular structure of the complex N-(8-quinolyl) pyridine-2-carbaldimine, 8-aminoquinoline monohydrate, nickel(II)-di-perchlorate. $[\text{Ni}(\text{C}_9\text{H}_8\text{N}_2)(\text{C}_{15}\text{H}_{11}\text{N}_3)(\text{H}_2\text{O})]^{2+}[(\text{ClO}_4)_2]^{2-}$ 229

S. C. Biswas, R. K. Sen

Crystal and molecular structure of mesitil 235

J. Susaki, M. Konno, S. Akimoto

High-pressure synthesis and structural refinement of CdGeO_3 ilmenite 243

E. Rossmanith

UMWEG – A computer program for calculation and graphical representation of Umweganregung-patterns 253

H. Soylu

The crystal structure of manganese (II) L-tartrate tetrahydrate $\text{MnC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$ 255

G. P. Voutsas, A. G. Papazoglou, P. J. Rentzeperis, D. Siapakas

The crystal structure of antimony selenide, Sb_2Se_3 261

S. Haussühl

Elastic and thermoelastic properties of triclinic sodium hydrogen oxalate hydrate, $\text{NaHC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 269

H. Effenberger, J. Zemann

Single crystal X-ray investigation of norsethite, $\text{BaMg}(\text{CO}_3)_2$: one more mineral with an aplanar carbonate group 275

L. B. McCusker, Ch. Baerlocher, R. Nawaz

Rietveld refinement of the crystal structure of the new zeolite mineral gobbinsite 281

Y. Kudoh, Y. Takéuchi

The crystal structure of forsterite Mg_2SiO_4 under high pressure up to 149 kb 291

C. H. L. Kennard, G. Smith, G. Schiller

The crystal structure of *trans*-nonachlor, [1-*exo*, 2-*endo*, 3-*exo*-4,5,6,7,8,8-nonachloro-3a,4,7,7a-tetrahydro-4,7-methanoindane] 303

Short Communication

K. Peters, E.-M. Peters, H. G. von Schnering, H.-P. Abicht

Crystal structure of cis {[o-(dimethylaminomethyl)phenyl-C,N]-[o-(diphenylphosphinomethyl)phenyl-C,P]-palladium(II)} 313